

В.В. Наход, М.І. Скіпалький, П.В. Сахнюк, О.В. Замуруєва, С.А. Федосов

Волинський національний університет імені Лесі Українки

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ФОРМУВАННЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР

У статті проаналізовано публікації авторитетних світових науковців у галузі моделювання гетероструктур для розуміння закономірностей підтримки та розвитку цього напрямку у світі і в Україні, визначення перспектив нових досліджень. Розглянуто особливості міжнародної співпраці, окреслено коло провідних публікацій у науковій галузі, проаналізовано фактори впливу вчених різних країн на розвиток цієї галузі. Сформульовано пропозиції для покращення поширення результатів вітчизняних вчених у світовій науковій спільноті за цим напрямом.

Ключові слова: моделювання, гетероструктури, наукові дослідження, публікації, галузі знань.

V. Nakhod, M. Skipalskiy, P. Sakhniuk, O. Zamurujeva, S. Fedosov

MODELING OF PROCESSES FORMING HETEROSTRUCTURES

The article analyzes the publications of authoritative world scientists in the field of modeling of heterostructures to understand the patterns of support and development of this area in the world and in Ukraine, to identify prospects for new research. The peculiarities of international cooperation are considered, the range of leading publications in the scientific field is outlined, the factors of influence of scientists of different countries on the development of this field are analyzed. Proposals were formulated to improve the dissemination of the results of domestic scientists in the world scientific community in this direction.

Keywords: modeling, heterostructures, scientific research, publications, subject areas.

Постановка проблеми. Фізика двовимірних (2D) матеріалів і гетероструктур на основі таких кристалів розвивається надзвичайно швидко. З цими новими матеріалами почала з'являтися справжня двовимірна фізика (наприклад, відсутність дальнього порядку, двовимірні екситони, перехід від співмірного до неспівмірного тощо). Також починають з'являтися нові гетероструктурні пристрої, такі як тунельні транзистори, резонансні тунельні діоди та світловипромінювальні діоди. Складені з окремих двовимірних кристалів, такі пристрої використовують властивості цих матеріалів для створення функцій, недоступних в інших гетероструктурах.

Штучні гетероструктури Ван-дер-Ваальса з двовимірними (2D) атомними кристалами є перспективними як активний канал або як буферний контактний шар для пристроїв нового покоління. Однак справжні двовимірні гетероструктурні пристрої залишаються обмеженими через процес перенесення за участю домішок і формування метастабільної та неоднорідної гетероструктури. Підбір окремих двовимірних матеріалів у гетероструктури Ван-дер-Ваальса дозволяє створювати шаруваті тривимірні матеріали з бажаними електронними та оптичними властивостями. Основною проблемою у виготовленні цих структур є формування чистих границь між окремими двовимірними матеріалами, що впливає на ефективність пристроїв.

Проблемами моделювання гетероструктур займається значна кількість науковців усього світу, що відображено у великій кількості і цитованості публікацій у наукометричній базі даних Scopus та підтверджує актуальність таких досліджень. Однак, незначна кількість статей українських вчених є ознакою необхідної популяризації і розвитку цього перспективного наукового напрямку в українських наукових центрах.

Постановка завдань. В роботі поставлено мету – виконати аналіз досліджень, які стосуються моделювання процесів формування гетероструктур, зробити спробу визначити особливості розвитку даної тематики у світі та пошуку шляхів ефективного розвитку цього напрямку в Україні.

Методологія досліджень. Проведено аналіз публікацій, індексованих у наукометричній базі Scopus за ключовими словами (тегом) «modeling of heterostructures» (моделювання гетероструктур) і «modeling of heterostructure formation» (моделювання формування гетероструктур). Для порівняльного аналізу відібрано статті з пошуку у назві статті (Article title), анотації (Abstract) і ключових словах (Keywords) у 2 039 наукових працях за період 2002-2023 рр. Аналізувалися: країни і наукові організації авторів, наявність фінансової підтримки досліджень, самі публікації, а також найпопулярніші і найцитованіші видання, у яких здійснено публікацію, їх кількість та приналежність до галузі знань.

Викладення основного матеріалу. Станом на січень 2023 р. у наукометричній БД Scopus за період 1987-2023 рр. опубліковано 176 наукових праць пов'язаних з моделюванням формування гетероструктур, але значно більша їх кількість (2 427) у загальнішому запиті – моделювання гетероструктур. Це робить коректним і доцільним саме порівняльний аналіз за двома запитами (більш загального і уточненого). Високі сумарні h-індекси ($h = 94$ і 28) і щорічне (а з 2010 р. особливо різке) зростання кількості публікацій, лише підтверджує велику зацікавленість науковців до цих досліджень і особливо підвищений інтерес в останні роки.

Із аналізу за двома пошуковими запитами із 2 039 і 166 наукових праць за період 2002-2023 рр. більше половини всіх робіт незмінно опубліковано вченими зі США (рис. 1). Серед країн-лідерів, також, є: Китай, РФ, Німеччина, Франція тощо. Значно важливіше знати не країни-лідери, а установи, де проводяться передові дослідження, щоб переймати досвід їхньої діяльності. Такі дослідження з даної тематики зосереджено у провідних науково-дослідних центрах (табл. 1, рядок 1), серед яких: *CNRS Centre National de la Recherche Scientifique, Chinese Academy of Sciences, Purdue University, Massachusetts Institute of Technology, National University of Singapore, Cornell University* тощо. Саме ці організації займають лідируючі позиції з досліджень присвячених моделюванню процесів формування гетероструктур, а отже володіють високим науковим потенціалом і найкращими матеріально-технічними базами. Закономірно, що провідні центри належать саме країнам-лідерам, досвід яких українським науковцям слід вивчати і переймати, а організаціям налагоджувати тісні партнерські відносини.

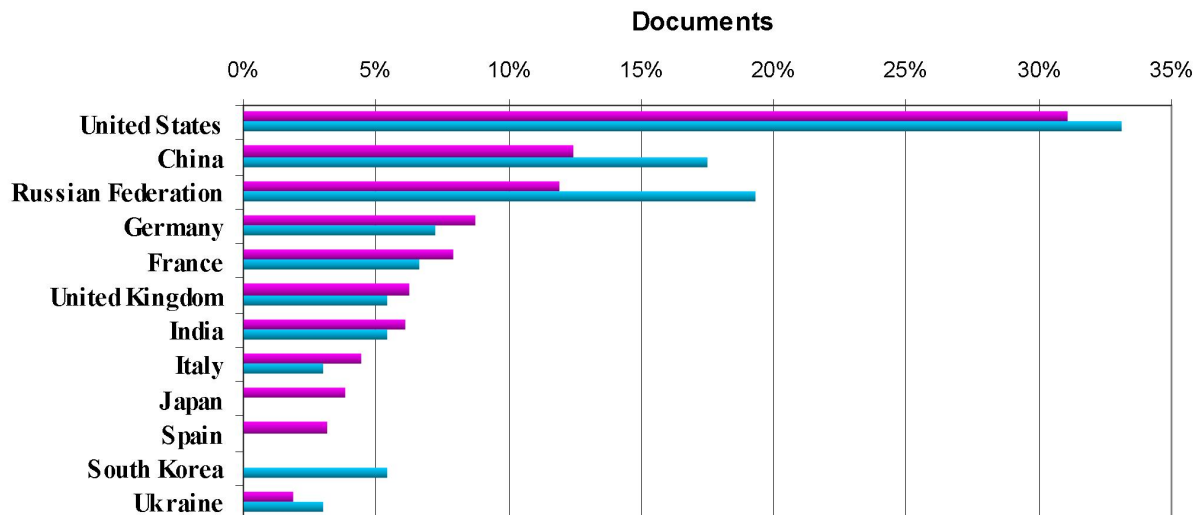


Рис. 1. Діаграма країн із найбільшою кількістю публікацій та України

Важливим аспектом для проведення досліджень є їх фінансова підтримка. Найбільшими світовими організаціями, що фінансують дослідження в даній галузі – здебільшого організації з Китаю, США і країн ЄС (табл. 1, рядок 2): *National Science Foundation, National Natural Science Foundation of China, U.S. Department of Energy, Horizon 2020 Framework Programme, Basic Energy Sciences, Deutsche Forschungsgemeinschaft, Office of Science* тощо. Майже усі ці організації, як і були, так і залишаються незмінними донині основними спонсорами досліджень. Тому для успішної реалізації досліджень українським науковцям слід шукати шляхи для їх фінансової підтримки саме серед цих потужних організацій. Як один із варіантів для українських вчених – виконання своїх досліджень або в закордонних центрах, які вже мають таку підтримку, вигравши певний дослідницький грант, або плідна співпраця української організації із закордонною.

У найцитованіших і водночас найновіших публікаціях (2002-2023 рр.) відображаються найбільш прогресивні і найактуальніші результати досліджень пов'язаних з моделюванням формувань гетероструктур. Автори [1] використали індуковане лазером фазове моделювання, розробку полі морфів для створення омічного гетерофазного гомопереходу між напівпровідниковим гексагональним (2H) і металевим моноклінним (1T') дителлуридом молібдену (MoTe_2), який є стабільним до 300°C і збільшує рухливість носіїв транзистора MoTe_2 приблизно в 50 разів, зберігаючи при цьому високе співвідношення струмів увімкнення/вимкнення 10^6 . Результати скануючої просвічуючої електронної мікроскопії в поєднанні з теоретичними

розрахунками показали, що вакансія Те запускає локальний фазовий перехід у MoTe_2 , досягаючи справжнього 2D приладу з омичним контактом. У [2] представлено техніку швидкого пакетного виготовлення гетероструктур Ван-дер-Ваальса, продемонстровану контрольованим виробництвом моно-, дво- і тришарових графенових стеків, інкапсульованих у гексагональний нітрид бору, з виходом, близьким до 100 %. Для одношарових пристроїв виявлено напівкласичні середні вільні довжини до 0,9 мкм, причому найвужчі зразки демонстрували чіткі ознаки того, що на рухливість впливало граничне розсіювання. У [3] повідомлено про однобаковий синтетичний підхід з використанням єдиного гетерогенного твердого джерела для безперервного виготовлення бічних гетероструктур з кількома контактами, що складаються з моношарів дихалькогенідів перехідних металів. Послідовне утворення гетеропереходів досягалося виключно зміною складу реакційноздатного газового середовища в присутності водяної пари. Це дозволяло вибірково контролювати спричинене водою окислення та випаровування кожного попередника перехідного металу, а також його зародження на підкладці, що призводить до послідовної крайової епітаксії окремих дихалькогенідів перехідного металу. Даний новий підхід пропонує більшу гнучкість і контроль, ніж попередні методи, для безперервного зростання бічних гетероструктур на основі перехідних металів і дихалькогенідів.

Таблиця 1.

Передові організації світових досліджень

Моделювання гетероструктур		Моделювання формування гетероструктур
<i>Russian Academy of Sciences, RF</i> <i>CNRS Centre National de la Recherche Scientifique, France</i> <i>Ioffe Institute, RF</i> <i>Chinese Academy of Sciences, China</i> <i>Purdue University, US</i> <i>National Institute for Materials Science, Japan</i> <i>Ministry of Education China, China</i> <i>National University of Singapore, Singapore</i> <i>Massachusetts Institute of Technology, US</i> <i>Pennsylvania State University, US</i>	Науково - дослідні центри	<i>Ioffe Institute, RF</i> <i>CNRS Centre National de la Recherche Scientifique, France</i> <i>Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics University ITMO, RF</i> <i>Russian Academy of Sciences, RF</i> <i>Chinese Academy of Sciences, China</i> <i>Cornell University, US</i> <i>National University of Singapore, Singapore</i> <i>Tsinghua University, China</i> <i>University of Nebraska–Lincoln, US</i> <i>University of California, Santa Barbara, US</i>
<i>National Science Foundation</i> <i>National Natural Science Foundation of China</i> <i>U.S. Department of Energy</i> <i>Russian Foundation for Basic Research</i> <i>Horizon 2020 Framework Programme Engineering and Physical Sciences Research Council</i> <i>Basic Energy Sciences</i> <i>Deutsche Forschungsgemeinschaft</i> <i>Office of Science</i> <i>European Research Council</i>	Організації, що фінансують дослідження	<i>National Science Foundation</i> <i>National Natural Science Foundation of China</i> <i>Russian Foundation for Basic Research</i> <i>Air Force Office of Scientific Research</i> <i>Russian Science Foundation</i> <i>U.S. Department of Energy</i> <i>Office of Science</i> <i>Basic Energy Sciences</i> <i>Department of Science and Technology, Ministry of Science and Technology, India</i> <i>Division of Materials Sciences and Engineering</i>

У [4] повідомлено про ефективну стратегію суттєвого інгібування дифузії іонів у площині в двовимірних галюїдних перовскітах шляхом включення жорстких π -спряжених органічних лігандів. Показані високостабільні та регульовані бічні епітаксціальні гетероструктури, мультигетероструктури та надгратки. Майже атомно чіткі межі розділу та епітаксійне зростання виявляються за допомогою просвічуючої електронної мікроскопії високої роздільної здатності з корекцією аберацій низької дози. Моделювання молекулярної динаміки підтвердило знижений

розлад гетероструктури та більшу енергію утворення вакансій двовимірних перовскітів у присутності спряжених лігандів. Ці результати дають зрозуміти іммобілізацію та стабілізацію галогенідних перовскітних напівпровідників і демонструють матеріальну платформу для складних і молекулярно-тонких надграток, пристроїв та інтегральних схем. У статті [5] представлено теоретичний аналіз поведінки дислокацій та релаксації напружень у семіполярній III-нітридній гетероепітаксії, наприклад, для шарів $Al_xGa_{1-x}N$ і $In_yGa_{1-y}N$, вирощених на напівполярних площинах типу hh2-h-m- або h0h-m підкладок GaN. Показано, що напруження зсуву на унікальній похилій базальній (0001) площині не звертаються до нуля для таких геометрій росту. Це призводить до початку релаксаційних процесів у напівполярних III-нітридних гетероструктурах через ковзання дислокацій у базальних системах ковзання і до утворення дислокацій невідповідності (MD) з деякими векторами Бюргерса на напівполярному гетероінтерфейсі. Результати моделювання обговорюються у світлі останніх експериментальних спостережень МН та нахилу кристалічної ґратки в семіполярних III-нітридних гетероепітаксціальних шарах.

Зокрема у найбільш цитованій з моделювання гетероструктур роботі [6] розглянуто властивості нових двовимірних кристалів і вивчено, як їхні властивості використовуються в нових гетероструктурних пристроях. Робота [7] присвячена вивченню гетероструктури, що складається з двошарового графену, в якому два шари графену закручені відносно один одного на певний кут. Експериментально продемонстровано, що для кутів близьких до «магічного» кута, структура електронної зони поблизу нульової енергії Фермі стає плоскою через сильний міжшаровий зв'язок. Властивості двошарових графенових гетероструктур із закрученим магічним кутом дозволяють припустити, що ці матеріали можна використовувати для вивчення інших екзотичних квантових фаз багатьох тіл у двох вимірах за відсутності магнітного поля. Доступність плоских зон через електричну настроюваність і настроюваність смуги пропускання через кут закручування може прокласти шлях до більш екзотичних корельованих систем, таких як нетрадиційні надпровідники та квантові спінові рідини. Автори [8] розширюють діапазон гетероструктур на основі 2D кристалів до фотоактивних за допомогою напівпровідникових діхалькогенідів перехідних металів (TMDC)/графенових стеків. Сингулярності Ван Хова в електронній щільності станів TMDC гарантують посилену взаємодію між світлом і речовиною, що призводить до посиленого поглинання фотонів і створення електронних дірок (які збираються в прозорих графенових електродах). Це дозволяє розробляти надзвичайно ефективні гнучкі фотоелектричні пристрої з фоточутливістю понад 0,1 А/Вт (що відповідає зовнішньому квантовому ККД понад 30 %).

У [9] автори вивчали контактну геометрію, в якій металізовано лише одновимірний край двовимірного шару графену. На додаток до кращої продуктивності звичайних поверхневих контактів, геометрія крайового контакту дозволила повністю відокремити збірку шарів і процеси металізації контактів. У графенових гетероструктурах це забезпечило високу електронну продуктивність, включаючи низькотемпературний балістичний транспорт на відстані більше 15 мікрометрів, і рухливість при кімнатній температурі, порівнянну з теоретичною межею розсіювання фононів. Геометрія крайового контакту надало нові можливості для проектування багатошарових структур із комплементарних 2D матеріалів. У [10] розглянуто значні останні досягнення та важливі нові розробки у 2D-матеріалах «за межами графену». Авторами надано уявлення про теоретичне моделювання та розуміння сил Ван-дер-Ваальса (vdW), які утримують разом двовимірні шари в об'ємних твердих тілах, а також їхні екситонні властивості та морфологію росту. Крім того, висвітлено нещодавні прориви в синтезі та характеристиках TMD і обговорено нові сімейства 2D матеріалів, включаючи моноелементні 2D матеріали (наприклад, силіцен, фосфорен тощо) і MXenes на основі карбиду та нітриду вуглецю перехідного металу. Також обговорено легування та функціоналізацію двовимірних матеріалів за межами графену, які дозволяють застосовувати пристрої, а потім прогрес у електронних, оптоелектронних і магнітних пристроях і теорії. Запропоновано, також, перспективи майбутнього двовимірних матеріалів за межами графену.

Найвагоміші результати досліджень світових науковців опубліковано у авторитетних виданнях (табл. 2). Найбільшу кількість водночас, як за загальнішим так і за уточненим запитом, опубліковано у журналах (табл. 2, рядок 1): *Journal of Applied Physics* (SJR 0,67), *Nature Communications* (SJR 4,85), *Physical Review B* (SJR 1,54), *Applied Physics Letters* (SJR 1,03), *Journal of Physics: Conference Series* (SJR 0,21), *Nano Letters* (SJR 3,76) тощо, які є традиційно найпопулярнішими для світових фахівців даного напрямку досліджень. Тоді як найбільш цитовані статті опубліковані в основному лише у топових Q1 (з високим SJR) журналах (табл. 2, рядок 1):

Science (SJR 14,59), *Nature* (SJR 17,9), *Nature Communications* (SJR 4,85), *ACS Nano* (SJR 4,61), *Nature Nanotechnology* (SJR 11,7) тощо. А журнали, такі як: *Nature Communications*, *Journal of Applied Physics*, водночас є як найбільш популярні так і цитованими. Також, значна кількість публікацій видана не лише у топових журналах, але й у великій кількості матеріалів конференцій, таких як: *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering* (SJR 0,19), *IEEE Transactions on Electron Devices* (SJR 0,7), *Materials Research Society Symposium - Proceedings*, що вказує на важливість участі науковців у роботі таких заходів, зокрема представлення на них своїх наукових результатів.

Таблиця 2.

Порівняльна характеристика джерела публікацій світових досліджень

Моделювання гетероструктур		Моделювання формування гетероструктур
<i>Journal of Applied Physics</i> , US (Q2 0,67) <i>Nature Communications</i> , UK (Q1 4,85) <i>Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering</i> , US (0,19) <i>Applied Physics Letters</i> , US (Q1 1,03) <i>Physical Review B</i> , US (Q1 1,54) <i>IEEE Transactions on Electron Devices</i> , US (Q2 0,7) <i>Journal of Physics: Conference Series</i> , UK (0,21) <i>Nano Letters</i> , US (Q1 3,76) <i>Materials Research Society Symposium - Proceedings</i> , US	Най-популярніші, країна (SJR)	<i>Nature Communications</i> , UK (Q1 4,85) <i>Physical Review B</i> , US (Q1 1,54) <i>Applied Surface Science</i> , Netherlands (Q1 1,15) <i>Journal of Physics: Conference Series</i> , UK (0,21) <i>Nano Letters</i> , US (Q1 3,76) <i>2D Materials</i> , UK (Q1 2,01) <i>ACS applied materials & interfaces</i> , US (Q1 2,14) <i>Applied Physics Letters</i> , US (Q1 1,03) <i>Journal of Applied Physics</i> , US (Q2 0,67) <i>Journal of Physical Chemistry C</i> , US (Q1 1,1)
<i>Science</i> , US (Q1 14,59) <i>Nature</i> , UK (Q1 17,9) <i>ACS Nano</i> , US (Q1 4,61) <i>Nature Nanotechnology</i> , UK (Q1 11,7)	Най-цитованіші, країна (SJR)	<i>Science</i> , US (Q1 14,59) <i>Nature Communications</i> , UK (Q1 4,85) <i>Nature</i> , UK (Q1 17,9) <i>Journal of Applied Physics</i> , US (Q2 0,67) <i>Small</i> , Germany (Q1 3,23) <i>Chemical Engineering Journal</i> , Netherlands (Q1 2,42)

Важливим аспектом сучасних досліджень є формування наукових колективів, із підбором і залученням фахівців з різних галузей знань, для забезпечення комплексних результатів. Тому цікавими і важливими є результати аналізу за галуззю знань, з якою позиціонується певна публікація. Для світових публікацій пов'язаних з моделюванням процесів формування гетероструктур, як за загальнішим так і за уточненим запитами, переважаючими є галузі: «Фізика та астрономія», «Матеріалознавство», «Інженерія», «Хімія» (рис. 2).

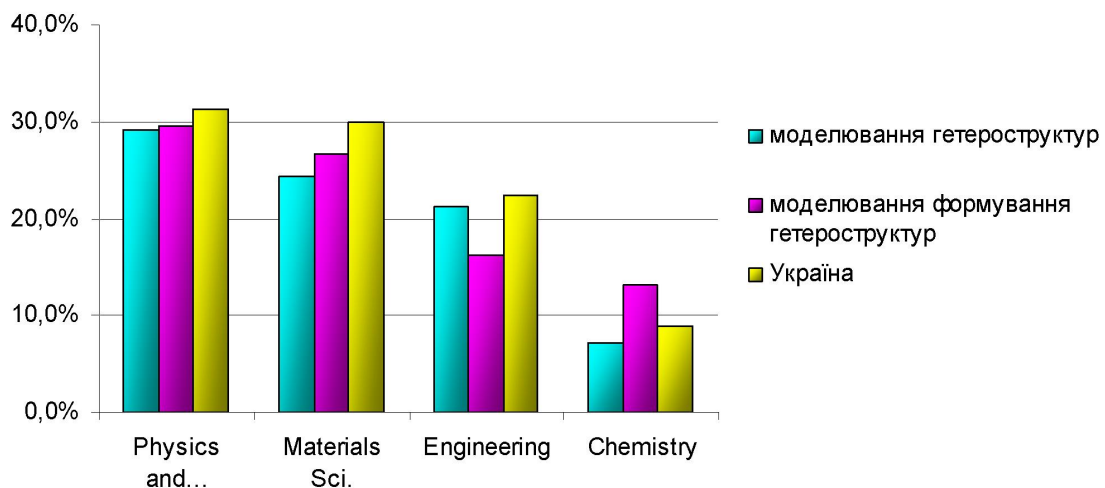


Рис. 2. Переважаючі галузі знань публікацій з моделювання процесів формування гетероструктур

Хоча загальна тенденція і зберігається незалежно від пошукового запиту – чітко виділені чотири галузі знань, однак, дещо вищі світові відсоткові значення кількості публікацій за більш загальним проти за уточненим запитами пов'язані з галуззю «Інженерія» (21,2 проти 16,2 %). Тоді як для «Матеріалознавства» (24,3 проти 26,7 %) і «Хімії» (7,2 проти 13,1 %) ситуація протилежна та майже незмінна для галузі «Фізика та астрономія» (29,1 і 29,6 %). Лідерство «Фізики та астрономії» вказує на те, що відповідні дослідження більше інтегровані саме до конкретних областей фізики і перейшли у практичне русло, яке пов'язане з матеріалознавством, інженерією чи хімією. Також є очевидними, в залежності від виду запиту, незначні зміни пріоритетів у напрямках досліджень, а саме інтерес науковців комп'ютерних наук і біохімії.

Для України, із 39 наукових публікацій за більш загальним запитом (за уточненим лише 5, тому оцінка не проводилася із-за некоректності аналізу) переважаючі є усі ті ж галузі як і в світі (рис. 1), лише з дещо іншими пріоритетами. Майже однакові значення для «Фізика та астрономія» (31,3 % проти 29,1 %) і «Інженерія» (22,5 проти 21,2 %) та дещо вищі для «Матеріалознавства» (30 проти 24,3 %) і «Хімії» (8,9 проти 7,2 %). Однак значно вищі українські відсоткові значення кількості публікацій за основними галузями знань проти світових становить більше 90 % (на інші близько 8 %) можна пояснити значним фундаментальним доробком, сконцентрованим саме на цих галузях. Менша за основними (80 %) і значно більша (20 %) кількості публікацій пов'язані з іншими галузями («Комп'ютерні науки», «Біохімія», «Біотехнології» тощо) пояснюється значними фундаментальними і розвинутими прикладними напрацюваннями. Світові науковці намагаються знайти практичне застосування результатів своїх досліджень. Також, часто такі напрями визначаються наявною матеріальною базою, розробленим програмним забезпеченням, або публікаціями у співпраці вчених з різних країн, де кожна наукова група чітко виконує свою частину роботи.

Висновки. Проведений порівняльний аналіз світових публікацій пов'язаних з вивченням проблем моделювання процесів формування гетероструктур (і моделювання гетероструктур) дає можливість зрозуміти, які сучасні виклики стоять перед науковцями і які можливі шляхи їх подолання. Однозначно, дана тематика є актуальною і потребує подальших комплексних наукових досліджень, як у фундаментальному так і прикладному аспектах. Наведена інформація і надані пропозиції в статті будуть корисним для українських фахівців, які займаються даним питаннями і дозволять раціонально спрямувати свою наукову діяльність для ефективних шляхів розвитку цього напрямку і розв'язання дослідницьких проблем на рівні світових.

Список використаних джерел:

10. Cho S., Kim S., Kim J.H., (...), Lee Y.H., Yang H. Phase patterning for ohmic homojunction contact in MoTe₂. *Science*. 2015. Vol. 349. № 6248. P. 625–628.

11. Pizzocchero F., Gammelgaard L., Jessen B.S., et al. The hot pick-up technique for batch assembly of van der Waals heterostructures. *Nature Communications*. 2016. Vol. 7. 11894.
12. Sahoo P.K., Memaran S., Xin Y., Balicas L., Gutiérrez H.R. One-pot growth of two-dimensional lateral heterostructures via sequential edge-epitaxy. *Nature*. 2018. Vol. 553, № 7686. P. 63–67.
13. Shi E., Yuan B., Shiring S.B., et al. Two-dimensional halide perovskite lateral epitaxial heterostructures. *Nature*. 2020. Vol. 580, № 7805. P. 614–620.
14. Romanov A.E., Young E.C., Wu F., (...), Denbaars S.P., Speck J.S. Basal plane misfit dislocations and stress relaxation in III-nitride semipolar heteroepitaxy. *Journal of Applied Physics*. 2011. Vol. 109, № 10. 103522.
15. Novoselov K.S., Mishchenko A., Carvalho A., Castro Neto A.H. 2D materials and van der Waals heterostructures. *Science*. 2016. Vol. 353, № 6298. aac9439.
16. Cao Y., Fatemi V., Demir A., (...), Ashoori R.C., Jarillo-Herrero P. Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices. *Nature*. 2018. Vol. 556, № 7699. P. 80–84.
17. Britnell L., Ribeiro R.M., Eckmann A., (...), Castro Neto A.H., Novoselov K.S. Strong light-matter interactions in heterostructures of atomically thin films). *Science*. 2013. Vol. 340, № 6138. P. 1311–1314.
18. Wang L., Meric I., Huang P.Y., (...), Shepard K.L., Dean C.R. One-dimensional electrical contact to a two-dimensional material. *Science*. 2013. Vol. 342, № 6158. P. 614–617.
19. Bhimanapati G.R., Lin Z., Meunier V., (...), Terrones M., Robinson J.A. Recent Advances in Two-Dimensional Materials beyond Graphene. *ACS Nano*. 2015. Vol. 9, № 12. P. 11509–11539.